

SiC_P/Al 复合材料晶面衍射弹性常数的 两相模型计算

刘力^{1,2}, 陈康华^{*1,2}, 娄瑾^{1,2}, 祝昌军^{1,2}

(1. 中南大学粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083; 2. 有色金属先进材料协同创新中心, 长沙 410083)

摘要: 通过分析外载荷作用下, SiC_P/Al 复合材料中 Al 基体相和 SiC 相的相互作用关系, 运用自洽方法和 Eshelby 夹杂理论, 建立了一套预测 SiC_P/Al 复合材料“晶面衍射弹性常数”的两相模型。运用该模型计算 SiC 相和 Al 相若干晶面的“晶面衍射弹性常数”, 并与实验测量值进行比对。结果显示, SiC 相的{101}及{116}晶面和 Al 相的{222}晶面的模型计算值均与实验值高度吻合, 偏差小于 6%。其他晶面的弹性常数与实验值的偏差均在 15%之内。说明该理论模型具有较好的预测性, 可靠性较高。通过这一理论预测模型来计算复合材料的“晶面衍射弹性常数”既能避免实验测量的繁琐, 减少人力和物力资源浪费, 又能得到难以通过实验测量获得的“晶面衍射弹性模量”。

关键词: 两相模型; 晶面衍射弹性常数; 金属基复合材料; SiC 颗粒; Al

中图分类号: TB330.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-3851(2017)07-1547-05

Calculation of diffraction elastic constants of SiC particle reinforced aluminum alloy composite by two phase model

LIU Li^{1,2}, CHEN Kanghua^{*1,2}, LOU Jin^{1,2}, ZHU Changjun^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China; 2. Collaborative Innovation Center of Advanced Nonferrous Structural Materials and Manufacturing, Changsha 410083, China)

Abstract: By analyzing the reaction between matrix (Al) and inclusions (SiC) in SiC particle reinforced aluminum alloy composite under uniaxial loading, a two phase model for accumulation of diffraction elastic constants of SiC particle reinforced aluminum alloy composite was built through using self-consistent model and inclusion model. Several diffraction elastic constants of Al phase and SiC phase were figured out by the two phase model. The results calculated by the two phase model of {101} and {116} of SiC and {222} of Al are all highly coincided with test results, which give only a difference of less than 6%. And the others show difference of less than 15%. All results show the theoretical model is reliable and can predict accurately. This kind of predict model can not only avoid the tedious experiment and save the money, but also can make accurate predictions of some materials difficult to test.

Keywords: two phase model; diffraction elastic constants; metal matrix composite; SiC particles; Al

碳化硅增强铝基复合材料一直是金属基复合材料发展的热点。SiC_P/Al 具有高的比强度和比模量、耐疲劳、耐磨、高屈服强度等优异的力学性能和物理性能, 在航空航天材料及封装材料领域得到广泛的应用^[1-4]。

当前, SiC_P/Al 复合材料主要用作结构材料, 它的强度依赖于基体相 Al 和增强颗粒 SiC_P 的含量以及交互作用, 因此, 研究加载状态下各个组成相之间的应力状态十分重要。中子衍射法和 X 射线衍射法是目前国际社会公认的能够精确测量复合材

收稿日期: 2016-07-15; 录用日期: 2016-09-02; 网络出版时间: 2016-09-14 08:55

网络出版地址: www.cnki.net/kcms/detail/11.1801.TB.20160914.0855.002.html

基金项目: 国家自然科学基金重大科研仪器设备研制专项(51327902); 国家科技重大专项(2014ZX04012011); 国家重点基础研究计划(2012CB619502)

通讯作者: 陈康华, 教授, 博士生导师, 研究方向为铝合金的热处理、硬质合金研制等 E-mail: khuachen@mail.csu.edu.cn

引用格式: 刘力, 陈康华, 娄瑾, 等. SiC_P/Al 复合材料晶面衍射弹性常数的两相模型计算[J]. 复合材料学报, 2017, 34(7): 1547-1551.

LIU Li, CHEN Kanghua, LOU Jin, et al. Calculation of diffraction elastic constants of SiC particle reinforced aluminum alloy composite by two phase model[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2017, 34(7): 1547-1551 (in Chinese).

料中各个组成相的相应力的方法^[5]。而组成相的“晶面衍射弹性常数”是测量过程中不可或缺的重要参数，它的数值大小直接影响测量的准确性。

目前，复合材料“晶面衍射弹性常数”的数值主要是通过实验测量获得，而对于这方面的理论研究较少。本论文在基于细观力学^[6]的基础上，通过分析复合材料中夹杂颗粒的应力和应变关系，运用自洽方法^[7-9]和 Eshelby 夹杂理论^[10]，建立一套预测 SiC_p/Al 复合材料“晶面衍射弹性常数”的理论模型。并用实验值进行验证，证明该模型的可靠性。

1 理论背景

“弹性常数”是用来表征材料在应力作用下抗变形能力的一个物理参数，它并非一个很新的概念，国内外学者对于这一领域也有很多成熟的研究。然而，随着衍射法(X射线衍射和 neutron 衍射)测量应力的推广，笼统的“弹性常数”已经不能满足需要。由于衍射法测应力的原理是通过测出满足布拉格衍射条件而出现的晶面衍射峰位置变化得出该晶面间距变化，从而求解出该晶面法线方向上的应变，再乘以该晶面的衍射弹性常数得到材料的应力。因此，和晶体材料结晶面相关的弹性常数参量即“晶面衍射弹性常数”成为材料应力研究领域的重点。

目前在该领域比较常用的模型是应力一定的 Reuss 模型和应变一定的 Voigt 模型以及考虑材料中不同领域之间相互作用的 Kroner 模型。其中，林政等^[11]通过利用微观分析使材料微观结构的物理性能与材料整体宏观的物理参量建立联系这一方法，系统地得出了单相多晶体材料“晶面衍射弹性常数”的计算公式。而通过其 Kroner-Reuss 模型^[12]得到的“晶面衍射弹性常数”就是目前广泛应用的通过 X 射线测试材料应力所需要用到的 X 射线弹性常数。然而，这一模型只适用于单相多晶体材料，虽然该方法被推广至含有球形夹杂的复合材料领域，但其中心思想仍然是把夹杂颗粒和基体当作一个整体单相处理，没有将复合材料中各相分离开来。因此，需要一个新的模型来计算复合材料的“晶面衍射弹性常数”。

2 模型介绍

本研究中，假定对象材料中所有晶粒都处在弹性变形范围之内，基体为各向同性的均质体，夹杂为球形颗粒且均匀分布在基体材料中，夹杂与基体

材料紧密相连并于边界处完全吻合。

2.1 通过自洽方法^[7-9]得到复合材料平均体积模量 \bar{K} 和平均剪切模量 \bar{G}

对于含有夹杂的均质材料，用自洽方法分析其在外载荷作用力下的应力与应变关系的实质是：把每个夹杂物看作嵌在等效弹性介质中，如图 1 所示。

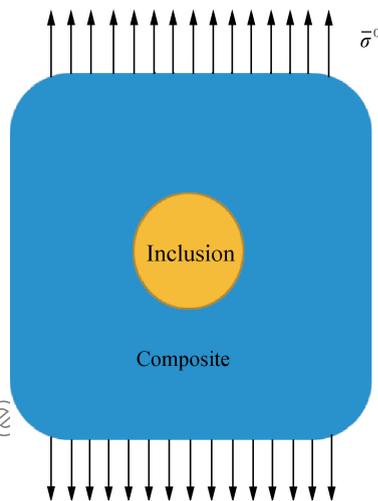


图 1 自洽方法模型
Fig. 1 Self-consistent model

根据 Eshelby 夹杂理论^[10]，在外加力 $\bar{\sigma}^0$ 作用下，夹杂相的平均应变 $\bar{\epsilon}^L$ 与复合体平均应变 $\bar{\epsilon}^0$ 的关系满足：

$$\bar{\epsilon}^L = A^L \bar{\epsilon}^0 = A^L \bar{\mu} \bar{\sigma}^0 \quad (1)$$

式中： A^L 表示应变集中张量； \mathbf{I} 表示单位矩阵； \bar{S}^L 表示夹杂相的 Eshelby 张量； $\bar{\mu}$ 表示复合体的平均柔度张量； C^L 表示夹杂相的弹性刚度张量； \bar{C} 表示复合体平均刚度张量。

由式(1)可得夹杂相的平均柔度张量 $\bar{\mu}^L$ 的表达式为

$$\bar{\mu}^L = A^L \bar{\mu} = \{\mathbf{I} + \bar{S}^L \bar{\mu} (C^L - \bar{C})\}^{-1} \quad (2)$$

由于夹杂颗粒均为圆球形，且均匀分布在基体中，复合材料宏观上表现为各向同性，那么有

$$S = (\alpha, \beta) = \left\{ \frac{3\bar{K}}{3\bar{K} + 4\bar{G}}, \frac{6(\bar{K} + 2\bar{G})}{5(3\bar{K} + 4\bar{G})} \right\}$$

$$C^L = (3K^L, 2G^L)$$

$$\bar{\mu} = \left\{ \frac{1}{3\bar{K}}, \frac{1}{2\bar{G}} \right\}$$

$$A^L = \left\{ \frac{\bar{K}}{(K^L - \bar{K})\alpha + \bar{K}}, \frac{\bar{G}}{(G^L - \bar{G})\beta + \bar{G}} \right\} \quad (3)$$

式中: \bar{K} 、 \bar{G} 分别表示复合体的平均体积模量和平均剪切模量; K^L 、 G^L 分别表示夹杂相的体积模量和剪切模量; S 表示复合体的 Eshelby 张量。将式(3)中各参量的表达式代入式(2)中可得复合体平均柔度张量 $\bar{\mu}^L$ 的表达式为

$$\bar{\mu}^L = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\bar{K} + \frac{1+\bar{\nu}}{3(1-\bar{\nu})}(K^L - \bar{K})}, \\ \frac{\frac{1}{2}}{\bar{G} + \frac{2(4-5\bar{\nu})}{15(1-\bar{\nu})}(G^L - \bar{G})} \end{array} \right\} \quad (4)$$

式中, $\bar{\nu} = (3\bar{K} - 2\bar{G}) / (6\bar{K} + 2\bar{G})$ 。

根据能量等效方法^[7]可得到复合材料的平均体积模量 \bar{K} 和平均剪切模量 \bar{G} 的表达式为

$$\frac{1}{\bar{K}} = \frac{1}{K} + c \left(1 - \frac{K^L}{K} \right) \frac{1}{\bar{K} + \frac{1+\bar{\nu}}{3(1-\bar{\nu})}(K^L - \bar{K})} \quad (5)$$

$$\frac{1}{\bar{G}} = \frac{1}{G} + c \left(1 - \frac{G^L}{G} \right) \frac{1}{\bar{G} + \frac{2(4-5\bar{\nu})}{15(1-\bar{\nu})}(G^L - \bar{G})} \quad (6)$$

式中, c 表示夹杂相的体积分数。

2.2 复合材料的宏观应力和应变分析

复合材料的宏观应力示意图如图 2 所示。

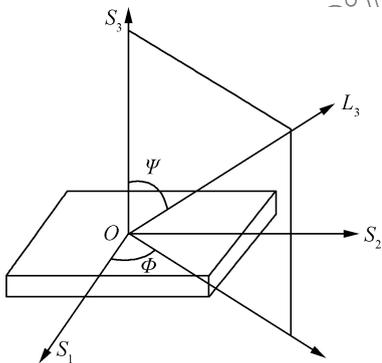


图 2 宏观应力分析示意图

Fig. 2 Diagram of the macroscopic stress analysis

当材料为各相同性, 且材料整体仅受单轴拉力 ($\sigma_{11} = \sigma^0 \neq 0$, 其他应力分量均为 0) 且 $\Phi = 0$ 的条件下, 根据胡克定律, L 相的相应变 ϵ^L 与宏观应力 σ^0 之间满足:

$$\frac{\epsilon^L}{\sigma^0} = \left[\frac{1 + \nu_L^{hkl}}{E_L^{hkl}} \right] \sin^2 \psi - \left[\frac{\nu_L^{hkl}}{E_L^{hkl}} \right] \quad (7)$$

式中, E_L^{hkl} 和 ν_L^{hkl} 为复合材料中 L 相的晶面衍射弹性模量和泊松比。

2.3 复合材料微观应力及应变分析

在复合材料的基体中考虑含有球状第二相 (L), 那么在复合材料整体弹性范围内球状 L 相的应变场 ϵ^L 应为

$$\epsilon^L = \bar{\epsilon}^0 + \epsilon \quad (8)$$

式中: $\bar{\epsilon}^0$ 为复合材料的平均应变场; ϵ 则是球状 L 相与其外部基体复合材料因彼此的弹性常数不同而导致的应变附加项。而球状 L 相内部的应力 σ^L 根据 Eshelby 等价异弹性体方法可得

$$\begin{aligned} \sigma^L &= C^L \epsilon^L = C^L (\bar{\epsilon}^0 + \epsilon) \\ &= \bar{C}^0 (\bar{\epsilon}^0 + \epsilon - \epsilon^*) \end{aligned} \quad (9)$$

式中: C^L 为球状 L 相的单晶体弹性常数; \bar{C}^0 为复合材料平均弹性常数; ϵ^* 则为复合材料固有应变。

由 Eshelby 夹杂理论可知

$$\epsilon = S^E \epsilon^*, \quad \epsilon^* = S^E \epsilon \quad (10)$$

式中, S^E 表示 Eshelby 张量。

将式(10)代入式(9)并变形后可得

$$(\bar{C}^0 - C^L) \bar{\epsilon}^0 = (C^L - \bar{C}^0 + \bar{C}^0 S^{E-1}) \epsilon \quad (11)$$

由于复合材料的负荷应变与载荷应力有如下关系:

$$\bar{\epsilon}^0 = \bar{S}^0 \sigma^0 = \bar{C}^0{}^{-1} \sigma^0 \quad (12)$$

式中, \bar{S}^0 为复合材料的平均弹性柔量, 将上式代入式(11)并整理可得

$$\epsilon = (C^L - \bar{C}^0 + \bar{C}^0 S^{E-1})^{-1} (\mathbf{I} - C^L \bar{S}^0) \sigma^0 \quad (13)$$

式中, \mathbf{I} 为单位矩阵, 令

$$T^L = (C^L - \bar{C}^0 + \bar{C}^0 S^{E-1})^{-1} (\mathbf{I} - C^L \bar{S}^0) \quad (14)$$

则有

$$\epsilon = T^L \sigma^0 \quad (15)$$

式中, \bar{S}^0 和 \bar{C}^0 以及 S^E 任何时候均为复合材料平均体积模量 \bar{K} 和平均剪切模量 \bar{G} 的函数, 其数值可由 2.1 节自洽方法求得。根据式(15)以及 T^L 的关系表达式可知, T^L 类似于材料弹性柔量, 为复合材料各相弹性柔量的相互作用因子。只要给定夹杂相的弹性常数 C^L 就能够求出 T^L 。

综上所述, 复合材料中夹杂相与外加应力的关系为

$$\epsilon^L = (\bar{S}^0 + T^L) \sigma^0 \quad (16)$$

考虑到夹杂相为杂乱无章分布, 且在三维空间中各取向的分布概率相同, 当材料整体仅受单轴

应力的作用下,对夹杂相某(h, k, l)晶面应变进行平均。再和宏观应力,应变关系比对可得到对于立方晶系复合材料 L 相的“晶面衍射弹性常数”的计算公式为

$$E_L^{hkl} = \frac{1}{(1/E)_M + t_{11}^L - [2(t_{11}^L - t_{12}^L) - t_{44}^L]\Gamma} \quad (17)$$

$$\nu_L^{hkl} = \frac{2[t_{12}^L - (\nu/E)_M + [2(t_{11}^L - t_{12}^L) - t_{44}^L]\Gamma]}{2\{[2(t_{11}^L - t_{12}^L) - t_{44}^L]\Gamma - t_{11}^L - (1/E)_M\}}$$

式中: E_M 和 ν_M 表示复合材料的平均弹性常数和平均泊松比; Γ 是与晶面指数有关的参数; t_{ij}^L 对应矩阵 T^L 第 i 行、第 j 列的元素。其中:

$$E_M = \frac{9\bar{K}\bar{G}}{3\bar{K} + \bar{G}}, \nu_M = \frac{3\bar{K} - 2\bar{G}}{2(3\bar{K} + \bar{G})} \quad (18)$$

$$\Gamma = u^2v^2 + v^2w^2 + u^2w^2$$

$$(u, v, w) = \frac{(h, k, l)}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (19)$$

同理,将夹杂相 L 替换成基体相就能得到复合材料中基体相的“晶面衍射弹性常数”,这里就不多赘述。

3 计算结果与验证

对于本文所研究的 SiC_p/Al 材料,其中含 20wt% SiC 和 80wt% 基体 Al。基体相 Al 和夹杂相 SiC 的单晶弹性常数 C_{ij} 见表 1。

表 1 SiC_p/Al 材料 SiC 相和 Al 相弹性常数 C_{ij} [13, 14]

Table 1 Parameters C_{ij} of SiC phase and Al phase [13, 14]

Phase	C_{11} /GPa	C_{12} /GPa	C_{44} /GPa
Al	108	62	28.5
SiC	390	142	256

利用表 1 中两相的弹性常数,通过 Kroner-Reuss 模型 [12] 可以得到 SiC 相和 Al 相的体积模量 K 和剪切模量 G 如表 2 所示。

表 2 SiC 相和 Al 相的体积模量 K 和剪切模量 G

Table 2 Bulk modulus K and shear modulus G of SiC phase and Al phase

Phase	Bulk modulus K /GPa	Shear modulus G /GPa
Al	26.2	77.3
SiC	191.4	224.7

由表 1 和表 2 的数据,代入到第二章介绍的计算模型中可得到 SiC_p/Al 材料中 SiC 相和 Al 相的“晶面衍射弹性常数”值。并与文献报道的实验值 [15] 进行比对,如表 3 所示。

表 3 SiC_p/Al 材料晶面弹性常数计算值和实验值
Table 3 Calculated value and experimental value of diffraction elastic constants of SiC_p/Al

Phase	Diffraction face	Experiment E_{hkl} /GPa	Calculation E_{hkl} /GPa
SiC	{102}	242	251.5
SiC	{110}	218	251.4
SiC	{101}	254	251.4
SiC	{116}	206	218
Al	{200}	95	82
Al	{311}	91	84.7
Al	{222}	100	97
Al	{511}	98	83.2

4 结论

(1) 运用自洽方法和 Eshelby 夹杂理论,建立一套预测 SiC_p/Al 复合材料“晶面衍射弹性常数”的两相模型。对于 SiC 相,理论模型预测值比实验值略微偏高,其中只有 {110} 晶面的偏差稍大,其他晶面偏差不超过 6%;对于 Al 基体相,理论预测值比试验值略微偏低,其中 {222} 和 {311} 晶面匹配度较好, {200} 和 {511} 晶面偏差稍大,接近 15%。总体而言,较小的偏差证实了该理论模型的准确性和可靠性。

(2) 造成偏差的原因包括:实验中不同晶面的 X 射线衍射强度并非都能达到理想值,使获得的数据与真实值之间有一定偏差;理论模型假设材料均质且各向同性,夹杂为球形,这种理想化假设会造成一定的偏差;选取的 SiC 相以及 Al 基相的单晶弹性常数也会影响最终计算结果。

参考文献:

[1] KARPUR P, MATIKAS T E, KRISHNAMURTHY S. Ultrasonic characterization of the fiber-matrix interphase/interface for mechanics of continuous fiber reinforced metal matrix and ceramic matrix composites[J]. Composites Engineering, 1995, 5(6): 697-711.

[2] 王军, 严彪, 徐政. 金属基复合材料的发展和未来[J]. 上海有色金属, 1999, 20(4): 188-192.

WANG J, YAN B, XU Z. The future and development of metal matrix composite[J]. Shanghai Nonferrous Metals, 1999, 20(4): 188-192 (in Chinese).

[3] YU X X, LEE W B. The design and fabrication of an alumina reinforced aluminum composite Matetial[J]. Composites Part A, 2000, 31(3): 245-258.

[4] 张立斌. 国外碳化硅增强铝基复合材料的发展和近况[J]. 宇航材料工艺, 1990(2): 6-10.

ZHANG L B. The recent status and development of silicon

- carbide reinforced aluminum alloy composites in abroad[J]. *Aerospace Materials & Technology*, 1990(2): 6-10 (in Chinese).
- [5] AKINIWA Y, TANAKA K, HAYASHI M, et al. Neutron and X-Ray diffraction measurements of phase stresses in sic particulate reinforced aluminum composite[J]. *Journal of the Society of Materials Science Japan*, 1998, 47(7): 755-761.
- [6] 黄争鸣. 复合材料细观力学引论[M]. 北京: 科学出版社, 2004.
- HUANG Z M. An introduction to mesomechanics of composite material[M]. Peking: Science Press, 2004 (in Chinese).
- [7] 黄克智. 固体本构关系[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999: 156-164.
- HUANG K Z. The constitutive relation of solid[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1999: 156-164 (in Chinese).
- [8] MORI T, TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions[J]. *Acta Metallurgica*, 1973, 21(7): 571-574.
- [9] HUTCHINSON J W. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites[J]. *Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical & Engineering Sciences*, 1970, 319(1537): 247-272.
- [10] ESHELBY J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems[J]. *Proceedings of the Royal Society A Mathematical Physical & Engineering Sciences*, 1957, 241(1226): 376-396.
- [11] 林政, 刘昱. 材料弹性常数之新探[M]. 北京: 科学出版社, 2011: 92-111.
- LING Z, LIU Y. The new exploration of elastic constants [M]. Beijing: Science Press, 2011: 92-111 (in Chinese).
- [12] 林政, 刘昱. 具有立方晶系结构的多晶体材料的弹性常数——Y 弹性常数[J]. *物理学报*, 2009, 58(6): 4096-4102.
- LING Z, LIU Y. The elastic constants of polycrystalline materials with cubic system—Y elastic constants[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(6): 4096-4102 (in Chinese).
- [13] SIMMONS G, WANG H. Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties [M]. Massachusetts: MIT Press, 1965: 34.
- [14] 胡燕飞, 孔凡杰, 周春. 3C-SiC 的结构和热力学性质[J]. *物理化学学报*, 2008, 24(10): 1845-1849.
- HU Y F, KONG F J, ZHOU C. Structure and thermodynamic properties of 3C-SiC[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2008, 24(10): 1845-1849 (in Chinese).
- [15] MASHIYA S, KIMURA H, TANAKA K, et al. Evaluation of material properties of SiC particle reinforced aluminum alloy composite using neutron and X-ray diffraction[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2006, 437(1): 93-99.